

были использованы алифатические амины (диметиламин, диэтиламин, гексаметилендиамин) и гидразин, а в качестве пектинсодержащего сырья – яблочный жом и соцветия подсолнуха.

Наилучшие результаты были получены в реакции с гидразином гидратом. В этом случае удалось достичь общего выхода пектиновых веществ 8-9% со степенью замещения до 45%. Было показано, что с помощью промывки водой при различных значениях pH удастся эффективно очистить целевой продукт от примесей сахаров, ионов металлов и красителей. В ходе исследовательской работы проведены опыты по получению гидразида пектина из различных сортов яблок и образцов подсолнечника. На основании полученных данных путем определен наиболее эффективный способ получения гидразида пектина. Целевой продукт предполагается использовать в качестве эффективного эмульгатора для получения пищевых добавок.

1. Донченко Л.В., Фирсов Г.Г. Пектин: основные свойства, производство и применение. М.: ДеЛи принт, 2007. 276 с.

ДЕФОРМАЦИЯ ГЕТЕРОДИЕНА МЕТАЛЛОЦЕНТРОМ – МЕРА ИЗМЕНЕНИЯ РЕАКЦИОННЫХ ИНДЕКСОВ КООРДИНИРОВАННЫХ 1-ГЕТЕРО-1,3-ДИЕНОВ

Мирзаянов И.И., Курамышев А.И., Черкасов Р.А.

Казанский федеральный университет
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

Проведенные ранее исследования [1] позволили сделать предположение, что роль металлоцентра во внутрисферном региоселективном гидрофосфорилировании гетеродиенов более сложна, чем просто роль защитной группы.

Чтобы изучить причины изменений реакционной способности 1-гетеро-1,3-диенов, вызванных координацией с переходным металлом, мы провели квантово-химические расчеты свойств металлоорганических производных α -енонов с помощью DFT.

Результаты наших расчетов показали важность искажения геометрии оксодиена, координированного с металлоцентром. Мы наблюдали значительное удлинение связей C=C и C=O, а также искажение валентных и торсионных углов.

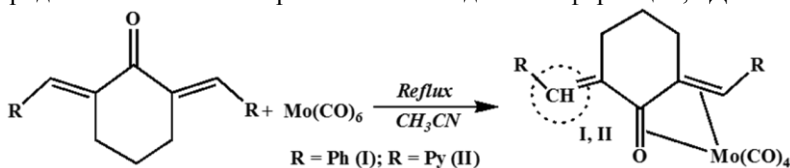
Изменение в геометрии приводит к утрате молекулой оксодиена планарного строения. Таким же образом изменяются геометрические параметры 1-аза-1,3-диенов и 1-тиоксо-1,3-диенов, координированных с

металлоцентрами различного типа. Мы посчитали, что такое изменение геометрии координированных лигандов может привести к утрате сопряжения между связями C=C и C=X, которое и влияет на результат внутрисферной функционализации лиганда.

Для проверки этих предположений мы оценили значения «энергии деформации лиганда» в соответствии с уравнением:

$$E_{stress} = \Delta H_{SP} - \Delta H_{GO},$$

где: E_{stress} – энергия деформации лиганда, кДж/моль; ΔH_{SP} – энергия лиганда в том геометрическом состоянии, которое он принимает в металлоорганическом соединении, кДж/моль; ΔH_{GO} – энергия свободного гетеродиена в наиболее энергетически выгодной конформации, кДж/моль.



Наше теоретическое предположение было подтверждено ^1H ЯМР исследованиями металлоорганических производных подгруппы хрома с присоединенными диенонами в качестве лигандов. Величины химических сдвигов атомов водорода ^1H ЯМР некоординированного олефинового фрагмента (выделено на схеме), для примера, 6,75 и 6,98 м.д. (для металлоорганических соединений I и II соответственно).

В докладе обсуждаются значения энергий деформации лиганда металлокомплексами и тенденции их изменения в комплексах различной гаптовости.

1. Курамшин А.И., Курамшина Е.А., Черкасов Р.А. // Журн. орган. химии. 2004. Т. 40, вып. 9. С. 1315–1323.

СИНТЕЗ МОНО- И (БИС)ИЛИДЕНТИАЗОЛОВ

Нестеренко О.О., Сунцова П.О., Бельская Н.П.

Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

1,3-Тиазолы и их производные проявляют широкий спектр биологической активности, включая противоопухолевую, антибактериальную, противовирусную и антигистаминную[1]. Удобным методом синтеза 1,3-тиазолов является реакция Ганча – взаимодействие галогенокарбонильных соединений с тиамидами. Интерес для изучения представляют